

# OpenMS

Development of a Quality Control Pipeline for  
Liquid Chromatography – Mass Spectrometry

**Chris Bielow**, Sandro Andreotti

Proteomics

Genomics

Transcriptomics

“OMICS”

Connectomics

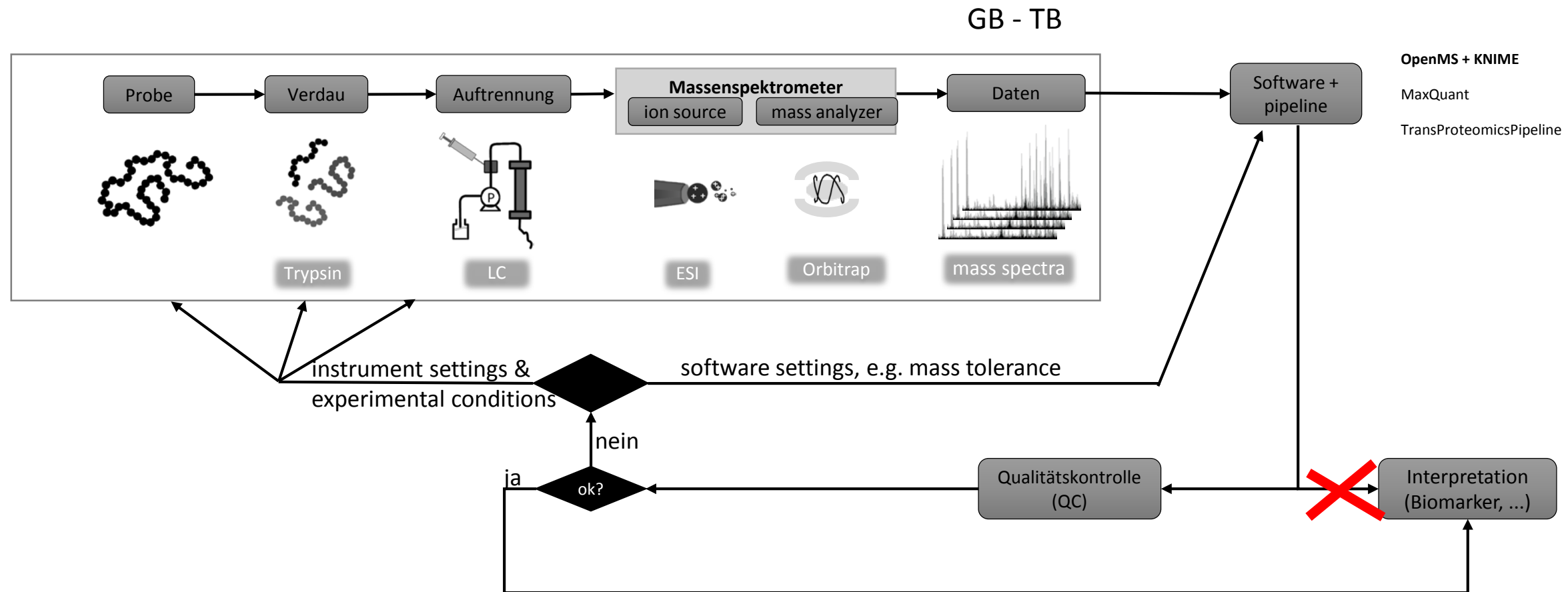
Foodomics

Metabolomics

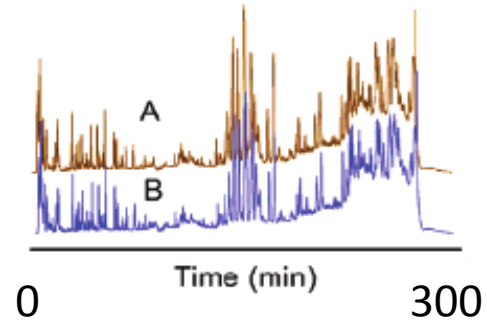
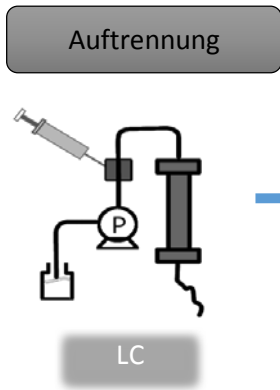
OMICS – Ganzheitliche Charakterisierung und Quantifizierung des entsprechenden Teilgebiets

# Proteomik-Pipeline

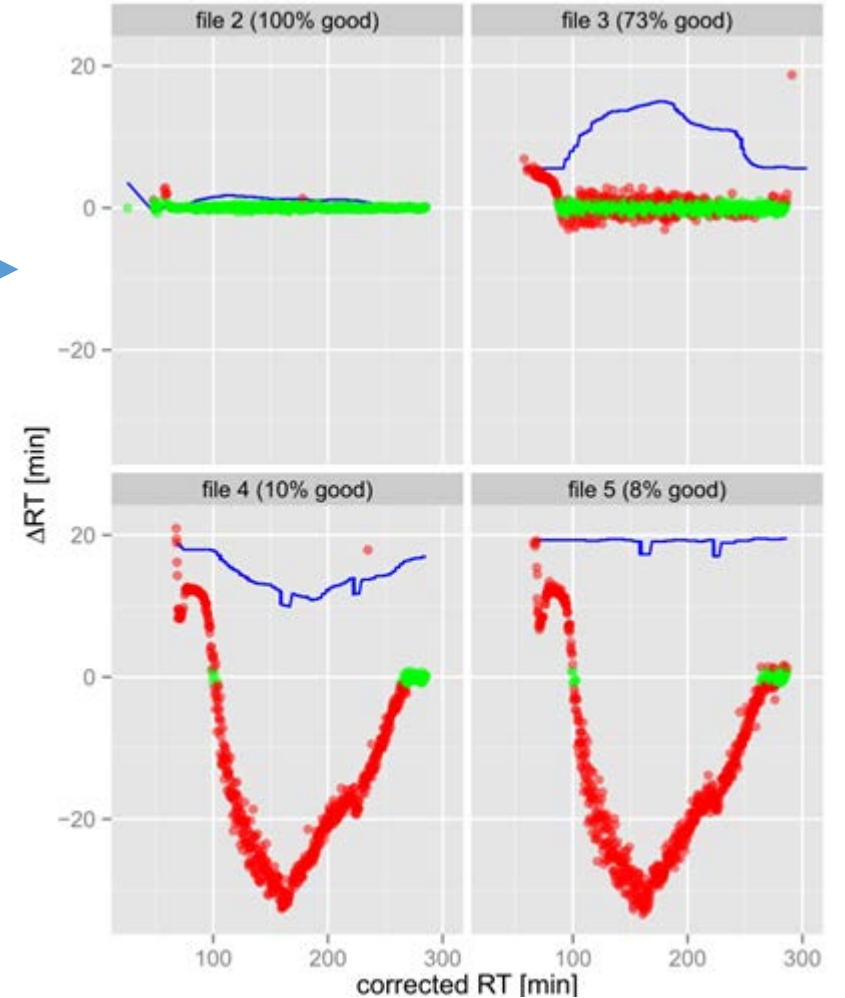
Mittel der Wahl: Liquid Chromatography (LC) + Massenspektrometrie (MS)



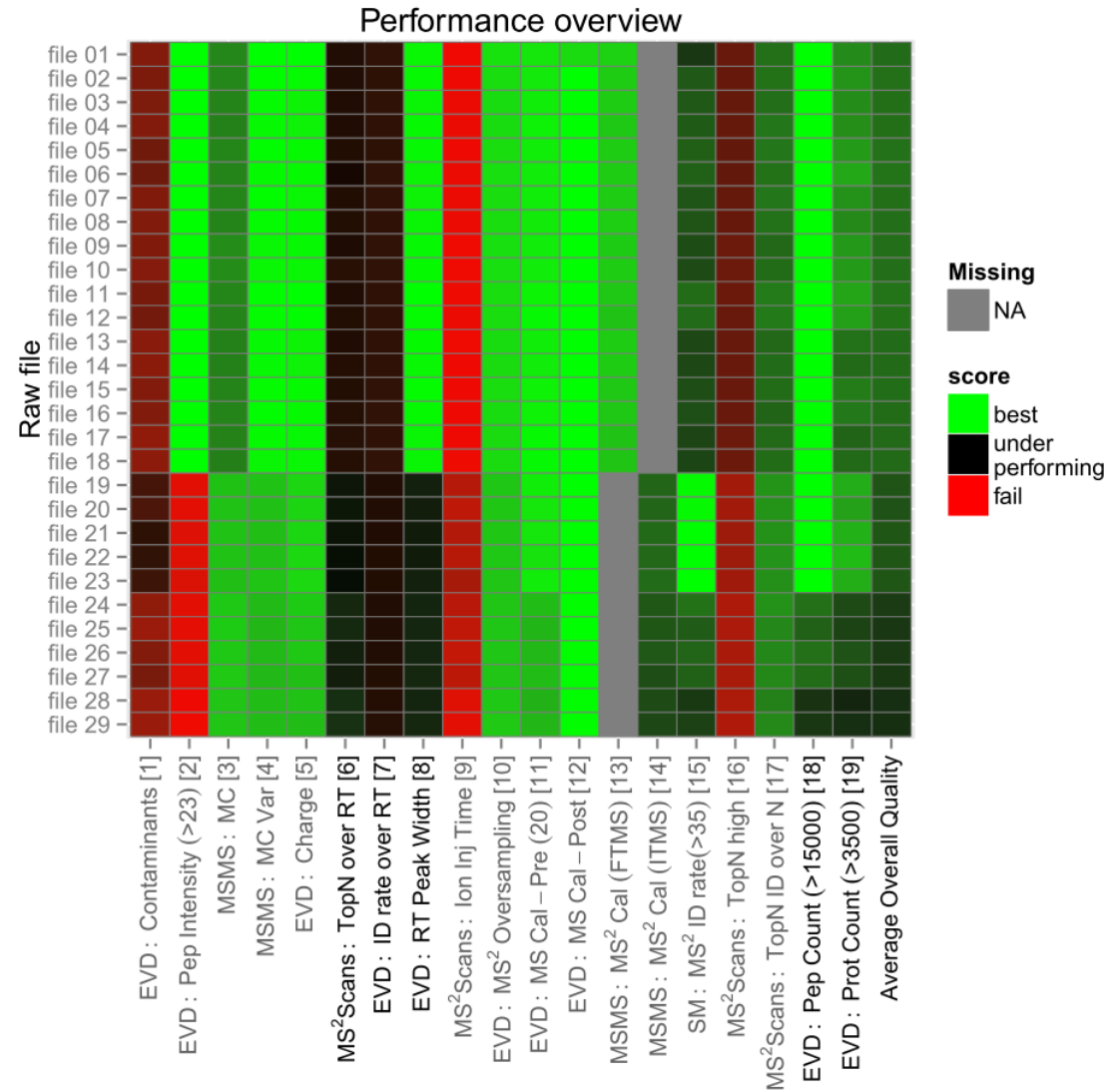
# QC Beispiel – Alignment von Retentionszeiten



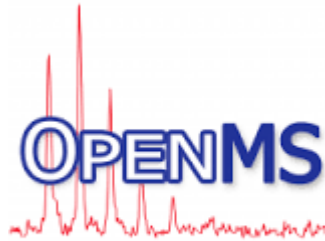
align



# QC Beispiel - Gesamtübersicht



# Software Pipeline (KNIME)



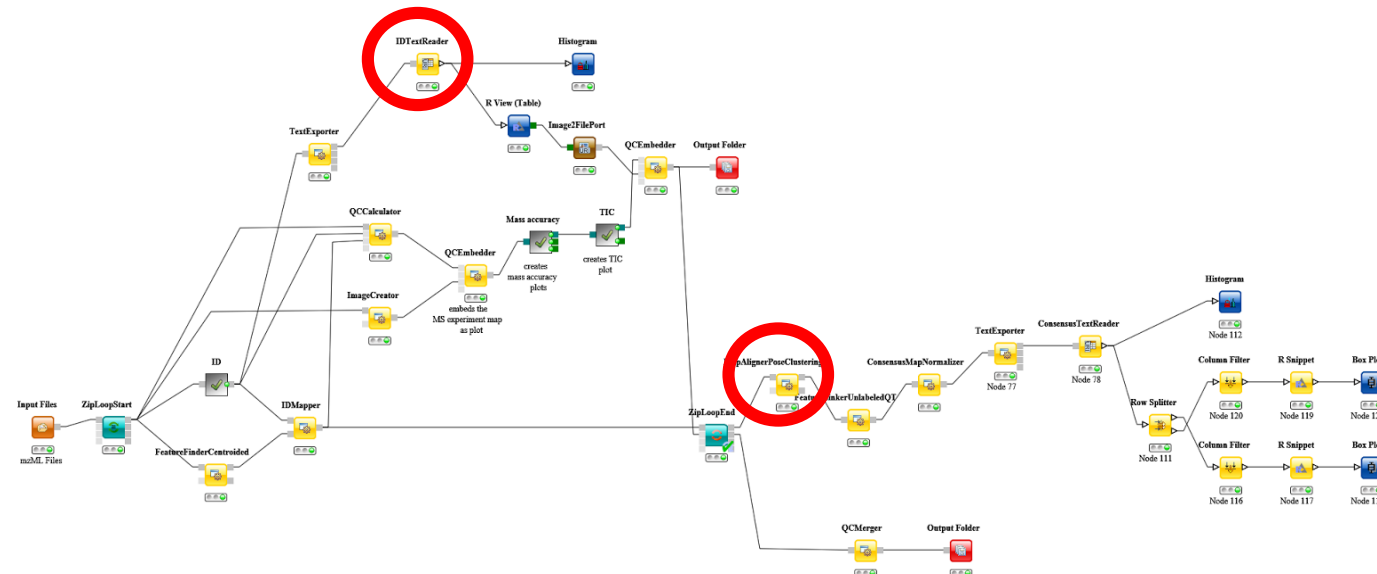
## OpenMS

- C++ Bibliothek für Analyse von LC-MS Daten
- Tools/Executables
  - 150 Tools
  - „Lego“



KNIME (konstanz information miner)

- Pipeline tool
- Visualisierung von Daten



# Zielstellung

- Implementierung von bekannten (oder neuen) Metriken zur Qualitätssicherung von LC-MS Experimenten
  - OpenMS C++
  - ca. 1-4 Metriken pro Team
- Visualisierung der Daten
  - Tabelle? / Plot (R/KNIME)
- Zusammenführung der Metriken in einem automatisierten Report
  - Abstimmung zwischen den Teams
- Erstellung eines Pull-Requests zur Aufnahme der neuen Funktionalität in die OpenMS-Entwicklerversion

# Zeitplan - Seminar

Mo, 20.3. - Fr, 24.3

- Einführung in Flüssigkeitschromatographie & Massenspektrometrie (LC-MS)
- OpenMS (C++ library)
- KNIME (Workflow engine)
- Git (version control software)
- Quality metrics

**Vorbesprechung:** Mittwoch, 01.03., 10:00 Uhr  
(verhandelbar)



# Zeitplan – praktischer Teil

Mo, 27.03 - Fr, 05.05.

## Woche 1(+2):

- KNIME & OpenMS-develop installieren
- Projekt auf <https://git.imp.fu-berlin.de> clonen
- Einarbeitung in OpenMS, KNIME
- Relevante Literatur lesen
- Externe Programme testen
- Metriken aussuchen, Zeitplan erstellen, Vortrag

## Woche 3+4

- Neue Metriken implementieren (C++/KNIME/R)
- Visualisieren
- Tests schreiben

## Woche 5

- Workflows finalisieren (C++/KNIME/R); bugs fixen;
- Abschlussbericht schreiben (Resultate, Metriken, Screenshots, Workflows)

**10.-12.5 Talk** vorbereiten & halten (ca. 30-45min) [verschoben wegen Feiertagen]

## wöchentliche Besprechung

Freitags: 10-12 Uhr,

Weiteres Vorgehen, Anpassung des Zeitplans, Problemlösung

# Vorraussetzungen

- Erfahrung in Objektorientierter Programmierung (Java, C++, ...)
  - C++ Kenntnisse empfehlenswert (keine Templates)

# Empfehlenswert

- R Grundwissen (ggplot2)

# Fragen?

- mehr Fragen
  - Raum K21
  - [chris.bielow@fu-berlin.de](mailto:chris.bielow@fu-berlin.de)

## Mehr Informationen

- OpenMS
  - [www.OpenMS.de](http://www.OpenMS.de)
- KNIME (konstanz information miner)
  - [www.knime.org](http://www.knime.org)